結晶成長問題と強特異拡散方程式 (異常拡散の数理)

AUTHOR(S):

儀我, 美保; 儀我, 美一

数理解析研究所講究録
第1854巻 2013年 33-56

結晶成長問題と強特異拡散方程式

東京大学・大学院数理科学研究科　儀我 美保 (Mi-Ho Giga)
Graduate School of Mathematical Sciences, University of Tokyo

東京大学・大学院数理科学研究科　儀我 美一 (Yoshikazu Giga)*
Graduate School of Mathematical Sciences, University of Tokyo

1　はじめに

結晶表面には，特に低温の場合ファセットと呼ばれる平らな面が現れる．成長していく結晶のファセット面の動きを記述するモデルはいくつかあるが，強特異拡散方程式で与えられる熱力学的巨視的モデルはその一つである．

拡散項が非線形の偏微分方程式の中で「拡散係数」が無限になり得る拡散方程式を特異拡散方程式という．この中でさらに，方程式の解の時間変化率が非局所的な量で決まる場合を強特異拡散方程式（very singular diffusion equation）と呼ぶことにする．

典型的な具体例として，全変動流方程式

$$u_t = \operatorname{div}\left(\frac{\nabla u}{|\nabla u|}\right), \quad x \in \mathbf{R}^n,\ t > 0$$

がある．その1次元版は

$$u_t = (\operatorname{sgn} u_x)_x, \quad x \in \mathbf{R},\ t > 0$$

である．この方程式は，形式的にはディラック関数を用いて

$$u_t = 2\delta(u_x)u_{xx}$$

と表される．拡散係数は非有界であるだけではなく，傾きゼロの面以外では拡散はなく退化している．ここで $u_t = \partial u/\partial t$, $u_x = \partial u/\partial x$, $\nabla u = (\partial_{x_1}u, \ldots, \partial_{x_n}u)$, $\partial_{x_i}u = \partial u/\partial x_i$ という記法を用いている．

結晶表面の蒸発・凝固モデルとして

$$u_t = \operatorname{div}\left(\frac{\nabla u}{|\nabla u|}\right) + q \operatorname{div}(|\nabla u|\nabla u)$$

*日本学術振興会 科学研究費補助金 基盤研究 (S) 21224001，基盤研究 (A) 24234015 の補助による．

がよく用いられている [S]．ただし $u=u(x,t)$ は平面の点 x における高さを表す関数である．また q は正定数である．この方程式は，エネルギー

$$E(u)=\int_{\mathbf{T}^2}\left(|\nabla u|+\frac{q}{3}|\nabla u|^3\right)\mathrm{d}x$$

の L^2 勾配流とみなせる．ただし $\mathbf{T}^2$ は 2 次元の平らなトーラスとする（方程式に周期境界条件を課している）．しかし，半導体の表面のように蒸発・凝固ではなく，ただ分子が表面上を拡散していくような表面拡散を主とする現象に対しては

$$u_t=-\Delta\left(\mathrm{div}\frac{\nabla u}{|\nabla u|}+q\,\mathrm{div}\left(|\nabla u|\nabla u\right)\right) \tag{1.1}$$

なる 4 階のモデルが提唱されている [S]．これは E の H^{-1} の勾配流とみなせる保存系である．

また単結晶の成長モデルとして，時刻 t での結晶表面 Γ_t（閉曲面とする）に対する曲率流方程式がしばしば用いられている．その具体形は

$$V=M(\vec{n})(\kappa_\gamma+\sigma)\quad(\Gamma_t\ \text{上}) \tag{1.2}$$

で与えられる．ここで V は外向き単位法ベクトル $\vec{n}$ 方向の法速度で，M は $\vec{n}$ にのみよる正関数で動的係数，κ_γ は後述の異方的平均曲率，σ は空間変数 x と時間変数 t のみによる正の関数でとりあえず既知とする．ファセット面は κ_γ が強特異拡散的になっていることによると考えられるが，結晶成長学界では必ずしも標準的な考え方ではない．一方で，2 次元（つまり Γ_t が曲線）の場合を中心に κ_γ をクリスタライン曲率とした数値計算の例は多い．

これらの問題で困難な点は，何をもって方程式の解とみなすかが非自明であることから生じる．実際，表面拡散による 4 階の問題では，現状では非線形半群論の枠組で解析できるもの以外は手がつけられていない状況である．表面拡散型の強特異拡散方程式 (1.1) について，$q=0$ の場合も含めて，その解の挙動については [GG10], [GK] を参照のこと．

一方，単結晶の成長モデルである (1.2) について，動的係数 M と表面エネルギー密度 γ の異方性の役割がしばしば混同されている．この小論では表面エネルギー密度 γ から定まるウルフ図形が原点を中心とする正凸多角形の場合（第 2 節参照），結晶サイズが成長限界サイズより少しだけ大きい場合に，有限時間でこのウルフ図形と同じ向きを持つ凸多角形が現れることを直観的な議論で示す．厳密な説明は [GG12] を参照してほしい．

2 巨視的モデル

雪結晶の成長を記述するモデルとして，ギブズ・トムソン効果や動的効果を含めたステファン型のモデルがある．もちろんセル・オートマトルに基づく微視的なモデル [GrGr] もあるが，ここでは巨視的モデルであるステファン型のモデルを考える．

まず κ_γ の定義を振り返る．これは形式的には

$$\kappa_\gamma = -\operatorname{div}_\Gamma(\nabla_p \gamma(\vec{n})) \quad (\text{曲面 }\Gamma\text{上})$$

で与えられる．γ は $\mathbf{R}^3$ 上定義された正斉次1次凸関数，$\nabla_p \gamma$ はその勾配，$\operatorname{div}_\Gamma$ は曲面 Γ 上の表面発散作用素である [G06]．γ の球面 S^2 上での制限 γ_0 を**表面エネルギー密度**と呼ぶ．通常 $\gamma_0 > 0$ と仮定する．$\gamma(p) = |p|$ の場合 κ_γ は通常の $\vec{n}$ 方向の平均曲率（の2倍）$\kappa = -\operatorname{div}_\Gamma \vec{n}$ に他ならない．

γ が（原点以外で）C^1 にならない場合が (2.3) が特異拡散方程式になる．この場合はその数学解析はあまり進んでいない．γ が $\mathbf{R}^n$ で定義されているとして，そのフランク図形を

$$\operatorname{Frank}\gamma = \{p \in \mathbf{R}^n \mid \gamma(p) \leq 1\}$$

とするとウルフ図形はその極集合として与えられる．すなわち

$$\operatorname{Wulff}\gamma = \{x \in \mathbf{R}^n \mid h(x) \leq 1\} =: W_\gamma$$

$$h(x) = \sup\{x \cdot p \mid p \in \operatorname{Frank}\gamma\}$$

と定義される．h は $\operatorname{Frank}\gamma$ の台関数と呼ばれている．$\operatorname{Frank}\gamma$ が凸多面体のとき γ をクリスタライン・エネルギーと呼ぶ．γ が C^1 級にならない典型的な例である．

次に Ω_t を結晶の外側の部分とする．数学的には時間 t に依存する $\mathbf{R}^3$ 内の外部領域であるとする．この中で気相内を水分子が拡散し，気体として留まれない余剰分が結晶面 $\Gamma_t = \partial\Omega_t$ に取り込まれていく．この過剰水分子濃度については（線型の）拡散方程式で記述されるが，拡散係数が十分大きいとした準平衡近似をすることにより，ラプラス方程式を考えることが多い．Γ_t 上では取り込まれた水分子は氷になるわけであるが，取り込まれた分だけ結晶面は前進することになる．ここで質量が保存することを要求する条件がステファン条件である．物理的係数をすべて正規化し，1とすると

$$-\Delta\sigma = 0 \quad (\text{於 }\Omega_t) \tag{2.1}$$

$$V = \partial\sigma/\partial\vec{n} \quad (\Gamma_t\text{上}) \tag{2.2}$$

となる．ここで σ は過飽和度といい，過剰な水分子の濃度を正規化したものである．Γ_t の単位法ベクトル $\vec{n}$ は Ω_t から見ると内向きで，結晶の成長していくほうに向いている．これにさらに結晶表面への分子の取り込まれ方（動的効果），および曲がってくるとまっすぐになるとする性質を考慮したいわゆるギブス・トムソン効果（曲率の効果）を含めると

$$V = M(\vec{n})(\kappa_\gamma + \sigma) \quad (\Gamma_t \text{上}) \tag{2.3}$$

を Γ_t 上で要求することになる．(M や γ は既知とする．)

(2.1)–(2.3) にさらに空間無限遠での条件

$$\sigma(x) \to \sigma_\infty \tag{2.4}$$

を課し，結晶形についての初期条件

$$\Omega_t|_{t=0} = \Omega_0 \tag{2.5}$$

を課した問題を，ギブス・トムソン効果（または表面張力効果）と動的過冷却効果を含めたステファン問題の準平衡近似という．水内の氷の成長の場合は，結晶の外に水分子がたくさんあり，結晶の成長の主な駆動力は温度勾配であるが，雪結晶のような気相成長の場合は結晶成長の主な駆動力は濃度である．動的過冷却効果という理由は，もともと σ が温度の場合につけられた名称である．(2.3) のかわりに $M(\vec{n}) = \infty$ として形式的に求まる $\kappa_\gamma + \sigma = 0$ が，いわゆる古典的なギブス・トムソン条件である．(2.3) のかわりに Γ_t 上で σ の値を既知とした問題は古典的ステファン問題で，特に (2.1) がラプラス方程式の場合はヘール・ショー問題とも呼ばれる．また結晶の内部では方程式を仮定していないので「1相問題」と呼ばれる．

解析学的な問題は与えられた $\sigma_\infty \in \mathbf{R}$, Ω_0 に対して (2.1)–(2.5) を満たす時間局所的な解をただ一つ作れるかということである．2相問題で γ が等方的の場合は κ_γ は通常の平均曲率となり，その時間局所可解性に対してはさまざまな結果が証明されている（例えば [ES]）．しかし γ が異方的な場合は文献も限られてくる．滑らかな異方性を考察した2相問題については Elliott-Deckelnik の結果 [DE] が代表的である．そこではギブス・トムソン効果と動的過冷却効果の両方が考慮されている．また1相問題の文献も限られてくる．等方的 γ で曲線に対する Mucha の結果がある [M06]．一方，2相のステファン問題（(2.1) のかわりに熱方程式を用いたもの）でギブス・トムソン効果および動的過冷却効果を加えて解の存在問題を議論した文献は多い．最近の [PS] を参照すると，これまでの進展がわかる．これについても1相問題となると意外に文献は少ない [Kn]．

雪結晶の場合は γ としてそのウルフ図形が六角柱のようなものを考える必要があるが，γ のウルフ図形が円柱であり，結晶形も円柱に限定すれば，その中では (2.1)–(2.5) は時間

局所的に可解であることがわかっている [GR02]．また，結晶が小さいうちは自己相似的な成長があることもわかっている [GR05]．しかし平らな面（ファセット面）上の σ は一定とは限らないので，一般にはファセットのまま成長することは不可能であることもわかっている [GR05]．

一方，最近 Berrett-Garcke-Nürnberg [BGN1], [BGN2], [BGN3] の進めてきた (2.1)–(2.5) に対する新しい計算法は，(2.3) が特異拡散方程式になる場合も解をよく近似できているようにみえる．数値計算なので，$\mathbf{R}^3$ または $\mathbf{R}^2$ のかわりに結晶を含む有界領域で行い，その境界で σ の値の σ_∞ を与えて計算しているが，問題の本質は同じである．彼らは 2 次元，3 次元両方の場合を計算している．γ のウルフ図形を六角柱とするなど，γ や M については [L] に従ってできるだけ現実に近い値を取るようにしている．その結果 [BGN3] では，いわゆる温度と過飽和度による雪結晶の形状の変化を表した中谷ダイヤグラムを復元することに成功している．過去に雪結晶のステファン問題による数値計算はいくつか試みられている．例えば横山 [Y] や横山-黒田 [YK] では (2.1)–(2.5) において κ_γ の項がない場合について数値計算が行われた．しかし [BGN3] の方法では，κ_γ がなければ動的係数 M の効果だけでは六角プリズム形となる Γ_t は作れないと結論している．おそらく [Y] や [YK] の数値計算法では，計算の近似方法の中に κ_γ に対応する平滑化効果が入っているのであると思われる．

Barrett らの計算はさまざまなことを示唆しているが，次の二つの点は，種結晶からごく短い時間の結晶成長で典型的である．

(i) 丸い種結晶にはすぐ平らな面が表れ，

(ii) 短い時間で（γ のウルフ図形や M を反映した）多面体（多角形）になる．

このことは，(2.3) の σ が正既知定数とし，かつ Frank γ が原点を中心とする正多角形（Wulff 図形もそうなる）ときに厳密に証明できる [GG12]．次節以下でこの問題に対する結果を述べる．

σ が x によるときの解析は自明でなく，[GG98] のようなグラフで曲線が表されている場合にようやく比較定理などが示されるようになってきた [GGR]．σ が定数の場合と異なり，スピードがファセットの上で一定とはならずファセットが曲がり得ることが本質的に困難な点である [GG98a]．ただし結晶が小さいうちは σ が定数でなくても曲がらないので [GR05]，本稿の以下の考察と類似のことがおそらく (2.1)–(2.5) の問題についてもいえると思われるが，その数学解析の道具はまだ十分整っていない．なお特異拡散方程式全般に関しては [G00], [G04] また本号の [GGP] が参考になる．また，特に高次元曲率流については [B] を参照するとよい．

3 瞬間的ファセット形成と短時間での全ファセット化

本節では曲率流方程式 (1.2)（または (2.3)）を平面内で動く曲線に対して考える．γ についてはクリスタラインを仮定するが，M については正値連続性のみを仮定する．仮定をまとめて書くと

(A) Frank γ は凸多角形で原点を内点に持つとする．また M は S^1 上の正値連続関数とする．さらに $\sigma \in \mathbf{R}$ は既知の定数とする．

この仮定のもと Frank γ の頂点の位置ベクトル $\vec{q}$ をその長さで割った $\vec{n} = \vec{q}/|\vec{q}|$ の全体を $\mathcal{N}$ で表す．$\mathcal{N}$ の元の個数は Frank γ の頂点の数に他ならない．γ_0 は $\mathcal{N}$ の方向以外では滑らかであるので，$\mathcal{N}$ を γ の**特異集合**ということがある．$\vec{n} \in \mathcal{N}$ を**許容方向**といい，$\vec{n} \in \mathcal{N}$ を法ベクトルとする（向きとする）線分は**許容ファセット**と呼ぶ．Frank γ の極集合である Wulff γ は，(A) の条件のもとでは凸多角形であるが，その辺はすべて**許容ファセット**であり，またその法ベクトル全体は $\mathcal{N}$ に等しい．

条件 (A) のもとでは [GG01] の一般論により等高面法 [G06] がこの場合にも拡張でき，任意の有界な初期形状 Γ_0 に対して (1.2) の広義解が時間大域的に一意に存在することがわかる．特に凸な初期曲線 Γ_0 からはいわゆる肥満現象が起きず凸の広義解 $\{\Gamma_t\}_{t\geq 0}$ が時間大域的に存在することがわかる [GG12, Theorem 2.3]．もちろん，有限時刻で Γ_t が空集合になる状況も許している．

定理 3.1（瞬間的ファセット形成）[GG12, Theorem 2.4]　γ, M, σ に対して (A) を仮定する．初期曲線 Γ_0 を有界凸集合の境界とする．$\{\Gamma_t\}_{t\geq 0}$ を Γ_0 を初期値とする (1.2) の広義解とする．このとき任意の許容方向に対して，その方向を向きとする許容ファセット（法ベクトルがその許容方向と同じ線分）が凸曲線 Γ_t に $t \in (0, T_*)$ 必ず存在する．ただし T_* は Γ_t の囲む面積が初めてゼロになる時刻とする．(そのような時刻がないときは $T_* = \infty$ と約束する.)

この定理は $t = 0$ の時点での Γ_0 にある許容方向を向きとする許容ファセットが存在しなくても，$t > 0$ $(t < T_*)$ では Γ_t にその方向を向きとする許容ファセットが必ず存在するということを主張している．またそのように生成されたファセットはずっと消えないことも主張している．なお初期形状が多角形の場合，初期形状に含まれていない方向を向きとする許容ファセットが瞬間的に生成されることは，クリスタライン流の場合はよく知られている [GG98], [GGH], [Oc]．また設定は関数のグラフの場合であるが，必ずしもクリスタライン・エネルギーでなくても，このような現象があることが示されている [M12], [MP12], [MP12a].

許容ファセット以外の辺のない凸多角形で，すべての許容方向と同じ向きを持つファセットを持つとき，**許容凸多角形**という．M が"角を保つ条件"（後述）を満たしていれば，対応する (1.2) の広義解 $\{\Gamma_t\}_{t\geq 0}$ はクリスタライン流に一致する [GG01]．そのような場合には，許容ファセットがずっと消えないことは古くから知られていた [AG], [T].（最近の進展については [I] を参照のこと．）

瞬間的にファセットが形成されることがわかったが，それでは有限時間で許容凸多角形になれるのであろうか？　特に全ファセット化するのであろうか．これについては σ が正で，初期の"結晶の形" Γ_0 が**臨界**ウルフ図形 C

$$C = (1/\sigma)W_\gamma = \{x/\sigma \mid x \in W_\gamma\}$$

を囲み，それに十分近い凸曲線であれば実際に起こることを示せる．なお臨界という理由は ∂C は (1.2) の定常解（時間変動しない解）であり，それより小さいと縮み，それより大きいと成長していくからである．

定理 3.2（全許容ファセット化）　(A) のほかさらに Frank γ が正 k 多角形でその中心が原点であるとする．また $\sigma > 0$ とする．M については後述の条件 (M) が満たされているとする．初期曲線 Γ_0 を C を含む有界凸集合 K_0 の境界とする．$\{\Gamma_t\}_{t\geq 0}$ を Γ_0 を初期値とする (1.2) の広義解とする．このとき Γ_t はある時刻 t_0 以後，時間に対して増加，すなわち Γ_t は Γ_s を $t > s\ (\geq t_0)$ ならば必ず囲んでいる．さらに次がいえる．

(i) Γ_0 が C の境界に十分近いとすると，Γ_t はある時間区間 $[t_1, t_2] \subset (0, T_*)$ で許容凸多角形となる．

(ii) さらに Γ_0 と M が γ と同じ対称性（つまり $\mathbf{Z}_k$ 対称性）を持つとすると，この許容凸多角形 Γ_t は ∂W_γ と時間区間 $[t_1, t_2]$ で相似である．すなわち t に依存する正実数 $\mu(t)$ が存在して $\Gamma_t = \mu(t)\partial W_\gamma$ となる．

(iii) さらに M が γ に S^1 上比例すれば（条件 (M) は自動的に満たされ），Γ_t は ∂W_γ に $t \geq t_1$ で相似である．

臨界 Wulff 図形に近い種結晶 K_0 は，やがて全部許容ファセット面で囲まれる許容凸多角形になることを主張している．ここまでは γ の効果が強く効いているといえる．実は時間が十分たつと，その漸近形は

$$(1/t)\Gamma_t \to \sigma\partial W_M \quad (t \to \infty) \tag{3.1}$$

となることがハフスドルフ距離の意味で知られている [IPS]．ここで W_M は M の Wulff 図形で，$W_M = \bigcap_{|\vec{m}|=1} \{x \in \mathbf{R}^n | \, x \cdot \vec{m} \le M(\vec{m})\}$ で定義される．([IPS] では γ が滑らかな場合に述べられているが，[KG] で指摘しているようにその説明は γ が特異な場合にも有効である．なおこの結果に対しては条件 (M) は不要である.) このことは W_M の辺の法ベクトルが許容方向でない場合，非許容ファセットが表れることを示唆している．したがって全許容ファセット状態は必ずしもずっと続くわけではない．(例えば $M \equiv 1$ の場合を考えてみれば，漸近形 σW_M は円板である.) ただこの漸近形の結果 (3.1) は時間の分だけ縮小してといった形で大変大ざっぱなものであり，細かい形状には注目していない．定理 3.1 によると，許容ファセットはずっと残っているとなっている，t が非常に大きくなると $1/t$ 倍 Γ_t を縮小してしまえば許容ファセットは 1 点に収束してしまうということが，例えば $M \equiv 1$ とした場合起こりうることを (3.1) は主張している．実際の数値計算例が [KG] にある．

条件 (M) は非許容ファセットが（許容ファセットの長さが短いうちは）生成されないための十分条件で，5.2 節で詳しく述べる．例えば，後述の M の Frank 図形が凸の場合はこの条件が満たされる．特に $M = \gamma$ や $M \equiv 1$ の場合には満たされる．

4　一般化されたクリスタライン流

定理 3.1，定理 3.2 を証明するために，初期凸曲線を多角形で近似し，その多角形を初期値としたクリスタライン流と呼ばれる多角形の運動によりもとの問題の広義解を近似する．そのような近似を可能とする一般的近似定理は [GG99], [GG00], [GG01] で確立されている．この近似能力のためクリスタライン流による近似をクリスタライン・アルゴリズムと呼ぶこともある．その収束の度合についての研究もある [GirK], [Gir].

4.1　角（カド）の保存条件とクリスタライン・アルゴリズム

まず曲率項 κ_γ のないハミルトン・ヤコビ方程式について考察する．M を仮定 (A) を満たす関数とし，σ を正定数として方程式

$$V = M(\vec{n})\sigma \tag{4.1}$$

を考えよう．凸多角形体 K_0 を考え，その各辺（ファセット）の向き（外向き単位法ベクトル）を $\vec{m}_1, \ldots, \vec{m}_r \in S^1$ $(r \ge 3)$ と S^1 上を時計向きに回るように番号づけられているとする．$\{\vec{m}_j\}_{j=1}^r$ を $\mathcal{M}$ とおく．この $S_0 = \partial K_0$ を初期値として (4.1) で動かしたとき，角度

を保ったまま凸多角形として成長できるかどうかという問題を考えよう．まず次の初等幾何的事実に注意しよう．

補題 4.1　向き $m \in S^1$ とパラメータ $h > 0$ を持つ半空間

$$H(m,h) = \{x \in \mathbf{R}^2 \mid x \cdot m \le h\}$$

を考える．S^1 上の異なる 2 点 m_1, m_2 が $m_1 \cdot m_2 > 0$ を満たすとする．S^1 上 m_1, m_2 を結ぶ弧のうち短い弧上の点を n とする．また h_1, $h_2 > 0$ とする．このとき

$$H(m_1,h_1) \cap H(m_2,h_2) \subset H(n,h)$$

となるための必要十分条件は

$$h \ge \frac{1}{\sin\varphi}\left(h_1 \sin\varphi_1 + h_2 \sin\varphi_2\right) \tag{4.2}$$

である．ここで φ は m_1, m_2 のなす角（ベクトル m_1 の偏角とベクトル m_2 の偏角との差の絶対値 $< \pi$），φ_l は m_l と m のなす角を表す $(l = 1,\ 2)$.（定義より $\varphi_1 + \varphi_2 = \varphi$ となる.）なお $H(n,h)$ の境界が $H(m_1,h_1) \cap H(m_2,h_2)$ と 1 点で交わるための必要十分条件は (4.2) で等号が成立することである．

さて凸多角形体 K_0（つまり $S_0 = \partial K_0$ が凸多角形）に対して各辺が速さ $M(\vec{m}_j)\sigma$ で $\vec{m}_j$ 方向に伸ばしていって作られる図形を (4.1) の解と考えたいが，M の $\mathcal{M}$ の外の値によっては（広義）解はカドが丸くなったり，新たな面が出現し得る．より正確に表現しよう．

K_0 を原点を含む有界凸多角形体とする．正のパラメータ $h_1^0, \cdots, h_r^0$ を用いて半平面の共通集合

$$K_0 = \bigcap_{j=1}^{r} H(\vec{m}_j, h_j^0) \tag{4.3}$$

と表される．K_0 の有界性より $\mathcal{M}$ を頂点とする多角形体が原点を内点に持つ．このとき

$$K_t = \bigcap_{j=1}^{r} H\left(\vec{m}_j, h_j(t)\right),\ h_j(t) = h_j^0 + M(\vec{m}_j)\sigma t \tag{4.4}$$

が（広義）解になるかどうかが問題である．M によっては $H\left(\vec{m}_j, h_j(t)\right) \cap H\left(\vec{m}_{j+1}, h_{j+1}(t)\right)$ のカドから $\mathcal{M}$ に属さない向きを持つ面が現れることがある．$\mathcal{M}$ に属さない向きが出現しないための十分条件が補題 4.1 より示せる．

補題 4.2（カド保存条件）　M が各 $j\ (= 1, \ldots, r)$ に対して

$$M(\vec{m}) = \frac{1}{\sin\varphi_{jj+1}}\left(M(\vec{m}_j)\sin\varphi_j + M(\vec{m}_{j+1})\sin\varphi_{j+1}\right) \tag{4.5}$$

を満たしているとする．ただし $\vec{m}$ は $\vec{m}_j$, $\vec{m}_{j+1}$ を結ぶ弧の上の点の単位位置ベクトル，φ_{jj+1} は $\vec{m}_j$, $\vec{m}_{j+1}$ のなす正の角とし，φ_j は $\vec{m}_j$ と $\vec{m}$, φ_{j+1} は $\vec{m}_{j+1}$ と $\vec{m}$ のなす正の角とする．(この条件を「カド保存条件」という.)（ただし $m_{r+1} = m_1$ と約束する.）このとき ∂K_t は (4.1) の $S_0 = \partial K_0$ を初期値とする広義解である．

$\mathcal{M}$ の元のみを向きに持つどんな多角形（凸とは限らない）に対しても，それを初期値とする解に $\mathcal{M}$ 以外の向きが現れないための必要十分条件が (4.5) であることも補題 4.1 より従う．凸多角形に限定すれば (4.5) は単に十分条件となる．

ところで (4.4) では K_t は凸多角形体であるが，その辺の数は減る可能性があることに注意したい．

条件 (4.5) を幾何学的に表現するとわかりやすいので，M を正斉次 1 次に $\mathbf{R}^2$ 上に拡張する．拡張した関数も M で表すと

$$M(p) = |p| M\,(p/|p|)\,, \quad p \neq 0$$

と定義される．この M の Frank 図形

$$\mathrm{Frank}\, M = \{x \,|M(x) \leq 1\}$$

($1/M$ の極図形でもあるが) を用いると (4.5) が幾何学的に表現される．

定理 4.3　$\mathcal{M}$ の元を頂点とする多角形体が原点を内点に含むとする．M がカド保存条件 (4.5) をすべてのカドで満たす必要かつ十分条件は，Frank M が $M(\vec{m}_j)\vec{m}_j$ $(\vec{m}_j \in \mathcal{M})$ を頂点とする多角形体であることである．(ただし $M(\vec{m}_j)\vec{m}_j$ のカドの角度は π ともなり得る.)

注意　(4.4) の解はある時刻から先では M のウルフ図形 W_M に現れる辺以外は消えてしまうか，長さが一定以下にとどまる．この場合は (3.1) は直接示すことができる．

4.2　一般化されたクリスタライン流

次に (1.2) の Γ_t を多角形に制限した運動を考えよう．通常は許容ファセットのみに制限して考えることが多いが，ここではより一般化した多角形を扱う．S^1 上の有限集合 $\mathcal{N}$, $\mathcal{M}$ に対して次を仮定する．

(B) $\mathcal{M}$ は $\mathcal{N}$ を含む S^1 に含まれる有限集合とし，M は $\mathcal{M}$ に対して角の保存条件 (4.5) を満たしているとする．(つまり Frank M が $M(\vec{m}_j)\vec{m}_j$ $(\vec{m}_j \in \mathcal{M})$ を頂点とする多角

形体であるとする（定理 4.3）.）$\mathcal{N}$ の元を頂点とする凸多角形体が原点を内部に含むとする.

凸多角形体 K_0 が (4.3) で与えられているとする．ただし，各 $\vec{m}_j$ に対応するファセットは長さが正とする．V_j を $\vec{m}_j$ 方向の外向き法速度とする．このとき (1.2) の代わりに，次の成長法則を満たす，凸多角形の発展形を考えよう.

$$V_i = M(\vec{n}_i)\left(\frac{-\Delta(\vec{n}_i)}{L_i(t)} + \sigma\right) \qquad \vec{n}_i \in \mathcal{N} \tag{4.6}$$

$$V_j = M(\vec{m}_j)\sigma \qquad \vec{m}_j \in \mathcal{M}\backslash\mathcal{N} \tag{4.7}$$

ここで $\Delta(\vec{n}_i)$ は $\vec{n}_i$ を向きとする W_γ のファセットの長さとし，$L_i(t)$ は $\vec{n}_i$ を向きとする ∂K_t のファセットの長さとする．$-\Delta(\vec{n}_i)/L_i$ が $\vec{n}_i$ 方向のクリスタライン曲率と呼ばれる量である．前節で見たように，$\vec{m}_j$ を向きとするファセットは，時間の経過とともに途中で消え得る．また $\mathcal{M}$ の対応する特定方向のファセットがない場合は，場合によって，その方向のファセットが生えてくることもある．M の効果のみによる新ファセット生成も考えると記述が複雑になるので，時間発展によりできるだけ不変なクラスを考えたい．そのために若干の準備をする.

定義 4.4（$\mathcal{Z}$ に付随する凸包）　単位円 S^1 上の 2 点 m_1, m_2 に対して，m_1, m_2 の生成する（π 未満の角の）閉錐 $C(m_1, m_2)$ を考える．すなわち $C(m_1, m_2) = \{x \in \mathbf{R}^2 |\ x = \mu\,(\lambda m_1 + (1-\lambda)m_2)\,,\, 0 \le \lambda \le 1,\ \mu \ge 0\}$ とする．F を平面内の閉集合とする．このとき

$$F_{C(m_1,m_2)} = \mathrm{co}\,(F \cap C(m_1, m_2))$$

とおく，つまり $F \cap C(m_1, m_2)$ の凸包を考える．次に $\mathcal{Z} = \{s_j\}_{j=1}^r \subset S^1$ とするとき

$$\mathrm{co}\,(F; \mathcal{Z}) = \bigcup_{j=1}^{r} F_{C(s_j, s_{j+1})}$$

を F の $\mathcal{Z}$ **に付随する凸包**という．ここで s_j は S^1 上時計回りに並べられ $s_{r+1} = s_1$ と約束する．また $\mathcal{Z}$ の隣りあう 2 ベクトルのなす角は π 未満とする．つまり $\mathcal{Z}$ を頂点とする多角形体が原点を内点に持つとする.

定義 4.5　$\mathcal{Z}$ を S^1 の有限部分集合とする．$M_{\mathcal{Z}}$ を

$$\mathrm{Frank}\,(M_{\mathcal{Z}}) = \mathrm{co}\,(\mathrm{Frank}\, M; \mathcal{Z})$$

となる正斉次 1 次関数とおく．この $M_{\mathcal{Z}}$ を M の $\mathcal{Z}$ に付随する包という．さて M が条件 (B) を満たすとする.（このとき $M_{\mathcal{M}} = M$ となる.）このとき $\mathcal{N}$ $(\subset \mathcal{M})$ に対して $M_{\mathcal{N}}$ を

考える（$\mathrm{Frank}\,(M_{\mathcal{N}}) = \mathrm{co}\,(\mathrm{Frank}\,M; \mathcal{N})$）．その $\mathrm{Frank}\,(M_{\mathcal{N}})$ の頂点が π 未満の頂点の方向ベクトル全体を $\mathcal{M}_{\mathcal{N}}$ で表す.（定義より $\mathcal{M}_{\mathcal{N}} \subset \mathcal{M}$ となる.）

定義 4.6（性質 G） M, $\mathcal{M}$, $\mathcal{N}$ が条件 (B) を満たすとする．平面内の凸多角形体 K が与えられ，その辺（ファセット）の向き全体を $\mathcal{K} = \{\vec{m}_1, \cdots, \vec{m}_r\}$ で表す．$\vec{m}_j$ は時計回りに番号づけられており，$\vec{m}_{r+j} = \vec{m}_j$ と表すことにする．$\mathcal{N} \subset \mathcal{K} \subset \mathcal{M}$ とする．また $\mathcal{N} = \{\vec{n}_1, \cdots, \vec{n}_k\}$ と表し，$\vec{n}_i$ は時計回りに番号づけられており，$\vec{n}_{k+1} = \vec{n}_1$ と表す．$i = 1, \cdots, k$ に対して

$$\mathcal{K}_i = C\,(\vec{n}_i, \vec{n}_{i+1}) \cap \mathcal{K}$$

とおき

$$\mathcal{K}_i = \{\vec{m}_l, \vec{m}_{l+1}, \cdots, \vec{m}_{l+\mu+1}\}$$

と表す．$\vec{m}_\alpha, \vec{m}_\beta \in \mathcal{K}_i$ $(\alpha < \beta)$ に対して

$$M_{i,\alpha,\beta} = \mathrm{co}\,(\mathrm{Frank}\,M \cap C\,(\vec{m}_\alpha, \vec{m}_\beta))$$

とおく．また $\mathcal{M}_{i,\alpha,\beta}$ は $M_{i,\alpha,\beta}$ の頂点が π 未満の方向ベクトル全体とする．このとき $\mathcal{K}$ が性質 G を満たすとは，任意の $\alpha, \beta \in \{l+1, \cdots, l+\mu\}$ $(\alpha < \beta)$ に対し，$\mathcal{M}_{i,\alpha,\beta} \subset \mathcal{K}$ となっていることをいう.（$\mathcal{N}$ が空の場合，任意の $\vec{m}_\alpha, \vec{m}_\beta \in \mathcal{K}$ に対して $\mathcal{M}_{i,\alpha,\beta} \subset \mathcal{K}$ となっていることをいう.）

$\mathcal{N}$ が空で性質 G を満たす凸多角形体を (4.1) で動かしていくと，その（広義）解は，ファセットが消えることがあっても，新たなファセットが生じることはないことが容易にわかる．また性質 G も保たれる．

この性質 G を満たす凸多角形体を (4.6)，(4.7) で動かしていくとは，許容ファセットの長さが大きくなり間に新たな非許容ファセットを入れていかないと (1.2) の（広義）解にならない場合がある．このようなことを考えなくてはいけない非許容ファセットは $\vec{n}_i$ と $\mathcal{K}$ との間の向きを持つものだけである．すなわち $\vec{n}_i$ と $\vec{m}_{l+1}$ の間にある $\mathcal{M}$ の向きや $\vec{m}_{l+\mu}$ と $\vec{n}_{i+1}$ の間にある $\mathcal{M}$ の向きを持つものだけである．他の非許容ファセットは消え得るだけで新たに増えることはない．実際，性質 G は時間発展に対して変わらない性質である．ここではアルゴリズムを書かないが，許容ファセットが長くなりその成長スピードが速くなり，あり得る向きを持った非許容ファセットのスピードと比較してある程度大きくなるとき，現在あるカドからこの向きを持った非許容ファセットを挿入させるという操作が必要である．このように作った凸多角形体の発展族を一般化された (1.2) のクリスタライン流と呼ぶことにする．[GG00] の考察と同様に次がいえる．

定理 4.7（整合性） (A)，(B) を仮定する．$\sigma > 0$ とする．性質 G を持つ凸多角形を初期値とした (1.2) の一般化されたクリスタライン流は，各時刻で性質 G を持ち，また (1.2) の同じ初期値を持つ広義解になる．

5 全許容ファセット化

本節では，定理 3.2 の証明の概略を示す．$\sigma > 0$ とする．考え方の基本は一般化されたクリスタライン流について，同様な主張を示し，一般的な場合を一般化されたクリスタライン流で近似するという方法である．定理 3.1 についても同様な考え方で示せる．この際すべての評価がこの近似によらずに一様であることにいつも注意を払う必要がある．本節では，簡単なために

(C) Frank γ は原点を中心とする k 正多角形体とする．

5.1 自己相似解による成長の上からの評価

C を臨界ウルフ図形 $((1/\sigma)W_\gamma)$ とする．方程式

$$V = a(\kappa_\gamma + \sigma) \tag{5.1}$$

を考える，ここで $a = \sup_{S^1} M$ とする．このとき $S_t^* = \partial\left(z(t)C\right)$ が (5.1) の解になるための必要十分条件は

$$\dot{z}(t) = ab^{-1}\left(-1/z(t) + \sigma\right) \tag{5.2}$$

を満たすことである．ただし $b = \gamma(\vec{n}_i)$，つまり Frank γ の頂点の位置ベクトルの長さで，$z(t) > 0$ とする．このような解は自己相似解と呼ばれている．

例えば $\delta > 0$ に対して $C_\delta = (1+\delta)C$（の境界）を初期値とした場合，この S_t^* で囲まれる凸多角形体 K_t^* を (4.4) のように台関数を用いて表すと

$$K_t^* = \bigcap_{i=1}^{k} \left\{H\left(\vec{n}_i, \lambda(t)\right) \mid \vec{n}_i \in \mathcal{N}\right\},\ \lambda(t) = z(t)b,\ z(0) = (1+\delta)/\sigma$$

となる．

命題 5.1（成長の上からの評価） (A)，(B)，(C) を仮定する．$\sigma > 0$ とする．C_δ を初期値とする (1.2) の一般化されたクリスタライン流を G_t^* とすると，$G_t^* \subset K_t^*$ となる．$T > 0$

を与える．$t \in [0,T]$ に対して，原点から $\Gamma_t^* = \partial G_t^*$ の $\vec{n}_i$-ファセットを含む直線への距離 d_i^* を用いて

$$G_t^* = \bigcap_{i=1}^{k} \{H(\vec{n}_i, d_i^*(t)) \mid \vec{n}_i \in \mathcal{N}\}$$

と表せるならば，$d_i^*(t) \leq \lambda(t)$ が成り立つ．ただし $\lambda(t) = z(t)b$ で $z(t)$ は $z(0) = (1+\delta)/\sigma$ を満たす (5.2) の解である．

証明　まず Γ_t^* の各辺（ファセット）の外向き成長速度は常に非負である．これは $\Gamma_0^*\,(= \partial C_\delta)$ のファセット上での外向き法速度が正で Γ_h^*（h は小さい正数）が Γ_0^* を囲むので，(1.2) のクリスライン流についての比較定理 [GGu] より，Γ_{t+h}^* は Γ_t^* を囲むからである．したがって Γ_t^* 上の各辺の $\kappa_\gamma + \sigma$ は非負となる．このことより Γ_t^* は (5.1) の「劣解」となり (5.2) についての比較定理 [GGu] を用いると $\Gamma_t^* \subset K_t^*$ となる．d_i^* の評価は，この包含関係の結果により明らかである．□

この Γ_t^* との比較により次が得られる．

命題 5.2（成長の上からの評価：一般形）　(A), (B), (C) を仮定する．$\sigma > 0$ とする．K_0 は，C を含み，C_δ に含まれる凸多角形体で性質 G を満たすとする．正のパラメータ $h_1^0, \cdots, h_r^0$ を用いて

$$K_0 = \bigcap_{j=1}^{r} \left\{H\left(\vec{m}_j, h_j^0\right) \mid \vec{m}_j \in \mathcal{K}\right\}$$

と表せるとする．K_t を初期値 K_0 とする (1.2) の一般化されたクリスタライン流とする．このとき $K_t \subset K_t^*$ となる．$T > 0$ を与える．$t \in [0,T]$ に対して

$$K_t = \bigcap_{j=1}^{r} \{H(\vec{m}_j, h_j(t)) \mid \vec{m}_j \in \mathcal{K}\} \tag{5.3}$$

と表せるとする．ここで $h_j(t)$ は $h_j(0) = h_j^0$ を満たす連続関数である．

$$h_i(t) \leq \lambda(t)$$

が成り立つ．ただし $h_i(t)$ は許容方向の向きのファセット $\vec{n}_i \in \mathcal{N}$ に対応している．

5.2　非許容ファセット非生成条件

さて，一般化されたクリスタライン流では非許容ファセットが許容ファセットの隣に生える可能性がある．しかし，ある条件を満たしていれば，このようなことは起きない．

この小節では，M, $\mathcal{M}$, $\mathcal{N}$ に対して，(A)，(B)，(C) を仮定する．K を性質 G を満たす凸多角形体とし，$\vec{n}_i \in \mathcal{N}$ を向きとする ∂K のファセットの長さを L_i と書く．すべての $\vec{n}_i \in \mathcal{N}$ に対して，

$$\vec{p}_i = \frac{\vec{n}_i}{M(\vec{n}_i)\left\{1 - \frac{\Delta(\vec{n}_i)}{L_i\sigma}\right\}}$$

とおく．次に定義 4.3 の記号 $l = l(i)$, $\mu = \mu(i)$ を用いる．∂K が性質 (F_i) を満たすとは，次が成り立つこととする．

(a) $\mu(i) \geq 1$ の場合：$\vec{p}_i$ と $\vec{m}_{l+1}/M(\vec{m}_{l+1})$ を結ぶ直線が $C(\vec{n}_i, \vec{n}_{l+1}) \cap \mathrm{Frank}\, M_{\mathcal{N}}$ の内部と交わらない．さらに $\vec{m}_{l+\mu}/M(\vec{m}_{l+\mu})$ と $\vec{p}_{i+1}$ を結ぶ直線が $C(\vec{m}_{l+\mu}, \vec{n}_{i+1}) \cap \mathrm{Frank}\, M_{\mathcal{N}}$ の内部と交わらない．

(b) $\mu(i) = 0$ の場合：$\vec{p}_i$ と $\vec{p}_{i+1}$ を結ぶ直線が $\mathrm{Frank}\, M_{\mathcal{N}}$ の内部と交わらない．

なお，この条件は $L_i\sigma \leq \Delta(\vec{n}_i)$ または $L_{i+1}\sigma < \Delta(\vec{n}_{i+1})$ となる場合は次のように解釈する．

(a) においては，$L_i\sigma \leq \Delta(\vec{n}_i)$ のときは「$\vec{p}_i$ と $\vec{m}_{l+1}/M(\vec{m}_{l+1})$ を結ぶ直線」のかわりに「$\vec{m}_{l+1}/M(\vec{m}_{l+1})$ を出発点とし $\vec{n}_i$ 方向にのびる半直線」に置きかえ，$L_{i+1}\sigma < \Delta(\vec{n}_{i+1})$ の場合も $\vec{p}_{i+1}$ にかかわる部分を同様に読み替える．

(b) においては，$L_i\sigma \leq \Delta(\vec{n}_i)$ かつ $L_{i+1}\sigma > \Delta(\vec{n}_{i+1})$ のときは「$\vec{p}_i$ と $\vec{p}_{i+1}$ を結ぶ直線」のかわりに「$\vec{p}_{i+1}$ を出発点とし $\vec{n}_i$ 方向にのびる半直線」に置きかえる．$L_i\sigma > \Delta(\vec{n}_i)$ かつ $L_{i+1}\sigma \leq \Delta(\vec{n}_{i+1})$ の場合も同様に読み替える．$L_i\sigma \leq \Delta(\vec{n}_i)$ かつ $L_{i+1}\sigma \leq \Delta(\vec{n}_{i+1})$ の場合は無条件と解釈する．

補題 5.3　(A), (B), (C) を仮定する．K を性質 G を満たす凸多角形とする．以下，定義 4.3 の表記を用いる．このとき (i)，(ii) が成り立つ．

(i) 頂点集合 $\{\vec{n}_i/M(\vec{n}_i) \mid \vec{n}_i \in \mathcal{N}\}$ からなる多角形が $\mathrm{co}(\mathrm{Frank}\, M)$ の内部を完全に含むとする．（K のファセット長によらない）次の条件が成り立っているとする．ある $y \in \{1, \cdots, k\}$ に対して，もし $\mu(i) \geq 1$ ならば，$\vec{n}_i/M(\vec{n}_i)$ と $\vec{m}_{l+1}/M(\vec{m}_{l+1})$ を結ぶ直線が $C(\vec{n}_i, \vec{m}_{l+1}) \cap \mathrm{Frank}\,(M_{\mathcal{N}})$ の内部と交わらない．さらに $\vec{m}_{l+\mu}/M(\vec{m}_{l+\mu})$ と $\vec{n}_{i+1}/M(\vec{n}_{i+1})$ を結ぶ直線が $C(\vec{m}_{l+\mu}, \vec{n}_{i+1}) \cap \mathrm{Frank}\,(M_{\mathcal{N}})$ の内部と交わらない．($\mu(i) = 0$ ならこれ以上の条件は課さない．) このとき ∂K はいつも性質 (F_i) を満たしている．

(ii) すべての $i = 1, \cdots, k$ に対して（K のファセット長によらない）次の条件 (K_i) が成り立っているとする．

もし $\mu(i) \geq 1$ ならば，$\{\lambda\vec{n}_i + \vec{m}_{l+1}/M(\vec{m}_{l+1}) \mid \lambda > 0\}$ なる半直線が $C(\vec{n}_i, \vec{m}_{l+1}) \cap \mathrm{Frank}\,(M_{\mathcal{N}})$ と交わらない．さらに $\{\lambda\vec{n}_{i+1} + \vec{m}_{l+\mu}/M(\vec{m}_{l+\mu}) \mid \lambda > 0\}$ なる半直線が $C(\vec{m}_{l+\mu}, \vec{n}_{i+1}) \cap \mathrm{Frank}\,(M_{\mathcal{N}})$ と交わらない．($\mu(i) = 0$ ならこれ以上の条件は課さない．)

このとき $K \subset C_{\delta'}$ を満たしていれば，いつもすべての $i = 1, \cdots, k$ に対して性質 (F_i) を満たすような，M, γ, $\mathcal{K}$ のみによる $\delta' > 0$ が存在する．

補題 5.3 (i) は初等幾何的考察から明らかである．(ii) も $K \subset C_{\delta'}$ で δ' を小さくとれば $L_i\sigma - \Delta(\vec{n}_i)$ をいくらでも小さくできることに注目すれば明らかである．ただ，どのくらい δ' を小さくすればよいかは $\mathcal{K}$ によってしまい，その値を評価することは難しい．そこで，このような δ' が M と γ によって一定にとれることを保証する M の十分条件 (M_i) を与える．

(M_i)　M は $\vec{n}_i$ 方向に次の意味で本質的に増加とする．W_i を $\mathrm{Frank}\,M$ と錐 $C(\vec{n}_{i-1}, \vec{n}_{i+1})$ の交わりとする．すなわち $W_i = \mathrm{Frank}\,M \cap C(\vec{n}_{i-1}, \vec{n}_{i+1})$ とする．この W_i の $\vec{n}_i$ 方向の高さ関数 [GG01] を

$$f_i(x) = \sup\left\{y \mid x\vec{n}_i^{\perp} + y\vec{n}_i \in W_i\right\},$$

$$x \in \mathrm{dom}\, f_i = \left\{x \mid x\vec{n}_i^{\perp} + y\vec{n}_i \in W_i \text{となる } y \in \mathbf{R} \text{ が存在する}\right\}$$

で定義する．ただし $\vec{n}_i^{\perp}$ は $\vec{n}_i$ に直交する単位ベクトルとする．($\vec{n}_i \cdot \vec{n}_{i+1} > 0$ とする．) この f_i についてある $\alpha_i \in (0, \pi/2)$ が存在して

$$f_i(x+h) - f_i(x) \geq -(\tan\alpha_i)h, \quad h > 0,\ x > 0,\ x + h \in \mathrm{dom}\, f_i,$$

$$f_i(x-h) - f_i(x) \geq -(\tan\alpha_i)h, \quad h > 0,\ x < 0,\ x - h \in \mathrm{dom}\, f_i$$

が成立する．

すべての $i = 1, \cdots, k$ に対して条件 (M_i) を満たすとき，単に条件 (M) を満たすという．

補題 5.4　補題 5.3 と同じ仮定をする．M が条件 (M) を満たし，$\alpha = \max \alpha_i$ とする．また K は条件 (K_i) を $i = 1, \cdots, k$ について満たしているとする．このとき α（と M と γ）にのみよる定数 L^* で $L^*\sigma > \max \Delta(\vec{n}_i)$ かつ $L < L^*$ ならば常に $i = 1, \cdots, k$ に対して性質 (F_i) を満たすものが存在する．特に $K \subset C_{\delta'}$ を満たしていれば常にすべての $i = 1, \cdots, k$ に対して性質 (F_i) を満たす，M, γ のみによる定数 δ' が存在する．

これは補題 5.3 と同様に示せる．δ' が $\mathcal{K}$ にもよらずにとれることが重要である．

命題 5.5　命題 5.2 と同じ仮定をする．このとき与えられた $\delta' > 0$ と $T > 0$ に対し，$\delta \in (0, \delta_1]$ ならば，

$$K_t \subset K_t^* \subset C_{\delta'} \quad \text{for} \quad t \in [0, T]$$

となるような $\delta_1 \in (0, \delta')$ が存在する．(この δ_1 は T と δ' のみによるので $\delta_1 = \delta_1(T, \delta')$ と書く．)

証明　$\lambda^\delta(t) := \lambda(t) = z(t)b$ は $\delta > 0$ と $t > 0$ に関して単調増加なので，

$$\lambda^\delta(T) = (1 + \delta)b/\sigma$$

なる δ を δ_1 とすれば，$\delta \in (0, \delta_1]$ と $t \in [0, T]$ に対して

$$\lambda^\delta(t) \leq (1 + \delta')b/\sigma$$

が成り立ち，命題が成り立つ． □

一般化されたクリスタライン流 $\tilde{K}_t$ が時刻 t で (K_i), (F_i) $(i = 1, \cdots, k)$ を満たしていれば，t の直後で新たに非許容ファセットは生成されない．したがって次の主張がいえる．

命題 5.6　(A), (B), (C) を仮定する．また M に対して条件 (M) を仮定する．また $\delta' > 0$ を補題 5.4 で定まる正数とする．この $\delta' > 0$ と与えられた $T_1 > 0$ に対して $\delta_1 = \delta_1(T_1, \delta') > 0$ を命題 5.5 で定まる正数とする．K_0 を命題 5.2 で与えられる凸多角形体とする．(ただし $\delta < \delta_1$ とする．) また条件 (K_i) を $i = 1, \cdots, k$ で満たすとする．このとき $\Gamma_t = \partial K_t$ には $t \in (0, T_1]$ で新たに非許容ファセットが生成されない．すなわち K_t は $t \in [0, T_1]$ で (5.3) で表される．

証明　$\tilde{K}_t$ を K_0 を初期値とする一般化されたクリスタライン流とする．

$$t_0 = \inf\left\{ t \in [0, T_1) \mid \tilde{K}_t \text{に新たな非許容ファセットが出現する} \right\}$$

とおく．$t_0 < T_1$ とする．まず条件 (K_i) は $t = t_0$ で満たされることに注意する．また性質 G も $t = t_0$ で満たされる．一方，整合性 (定理 4.7) と比較定理 [GG01] より $\tilde{K}_t \subset K_t^*$ $(t \in [0, T_1])$ となるので，命題 5.5 と δ' のとり方 (補題 5.4) より $\tilde{K}_{t_0}$ は条件 (F_i) をすべての $i = 1, \cdots, k$ で満たしている．条件 (F_i) $(i = 1, \cdots, k)$ が満たされれば，非許容ファセットは t_0 の直後で新たに生成されない．したがって $t_0 < T_1$ に矛盾する．よって $t_0 = T_1$ となり $t \in (0, T_1]$ で $\tilde{K}_t$ は K_t に一致する． □

5.3 非許容ファセットの成長の下からの評価

命題 5.2 の仮定を仮定する．向き $\vec{m}_j$ の非許容ファセットに対応する値 h_j を評価したい．$V_j = \dot{h}_j$ なので，まず (4.7) より

$$\dot{h}_j(t) = M(\vec{m}_j)\sigma \geq m\sigma, \quad m = \inf_{S^1} M$$

となる．もちろん，対応するファセットが時刻 t で存在していればの話である，$\vec{m}_j$-ファセットが $(0, T)$ で存在する限り

$$h_j(t) \geq m\sigma t + h_j(0) \tag{5.4}$$

となる．

5.4 非許容ファセットの消滅

まず一般化されたクリスタライン流に対してある時刻までに全ての非許容ファセットが消滅することを示す．命題 5.6 の仮定を仮定し $\delta' > 0$ をとる．与えられた $T_1 > 0$ に対し，命題 5.6 での δ_1 をとると非許容ファセットが生成されないので，一般化されたクリスタライン流は (5.3) で表されるとしてよい．

K_0 と K_t について $\mathcal{K} = \mathcal{M}$ として命題 5.2 の表記を用いる．$\vec{m}_j$ は時計回りに番号づけられているとする．また $\mathcal{N}$ の元 $\vec{n}_i$ も時計回りに番号づけられているとする．$\mathcal{N} \subset \mathcal{M}$ より，$\vec{m}_l = \vec{n}_i$, $\vec{m}_{l'} = \vec{n}_{i+1}$ なる $\vec{m}_l$, $\vec{m}_{l'} \in \mathcal{M}$ がある．（ここで $\vec{n}_{k+1} = \vec{n}_1$ と約束する．）もしも $\vec{m}_l$ と $\vec{m}_{l'}$ に挟まれた非許容方向 $\vec{m}_j \in \mathcal{M}$ があり，$\vec{m}_j$-ファセットがある時刻 $t \in (0, T_1)$ で ∂K_t に依存している（ファセット長が正である）ならば，補題 4.1 よりこの時刻 t で

$$h_j(t) < \frac{1}{\sin\varphi}\left\{h_l(t)\sin\varphi_{lj} + h_{l'}(t)\sin\left(\varphi - \varphi_{lj}\right)\right\}, \quad \varphi = \frac{2\pi}{k}$$

となっている．ここで φ_{lj} は $\vec{m}_l$ と $\vec{m}_j$ のなす角の絶対値である．命題 5.2 より $h_l \leq \lambda^\delta$, $h_{l'} \leq \lambda^\delta$ なので

$$\bar{c} := \max\left\{\frac{\sin\psi + \sin(\varphi - \psi)}{\sin\varphi} \,\middle|\, 0 \leq \psi \leq \varphi\right\} = \frac{1}{\cos(\varphi/2)}$$

とおくと，

$$h_j(t) < \bar{c}\lambda^\delta(t)$$

となる．一方，K_0 が C を含むので幾何学的条件より $h_j(0) \geq b/\sigma$ なので (5.4) より

$$h_j(t) \geq m\sigma t + b/\sigma.$$

（命題5.6より既に見たとおり命題5.2の仮定(5.3)が満たされることに注意する.）よって

$$\lambda^{\delta}(t) > \frac{1}{\bar{c}}\left\{m\sigma t + \frac{b}{\sigma}\right\} =: \rho(t) \tag{5.5}$$

を得る.

ところで

$$\lambda^{\delta}(t) \le \rho(t) \quad \text{for} \quad t \in [t^{\delta}, t^{\delta}+\tau] \tag{5.6}$$

なる $t^{\delta} \in (0, T_1)$ と適当な正数 τ が存在するように十分小さい $\delta \in (0, \delta_1]$ をとることが可能である．この δ を δ_2 と書く.

次に $\delta \in (0, \delta_2)$ ととろう．初期値の仮定により，∂K_0 に存在する非許容方向 $\vec{m}_j$ を向きとするファセットに対し，十分小さい $t > 0$ に対しては(5.5)が成り立つ．しかし $t \in [t^{\delta}, t^{\delta}+\tau]$ に対しては(5.6)により(5.5)は成り立たない．つまり $\vec{m}_j$-ファセットは少なくとも t^{δ} では消滅していることになる．したがって少なくとも $t \in [t^{\delta}, T_1]$ では ∂K_t は許容ファセットのみの多角形である.

以上が一般化されたクリスタライン流についての全許容ファセット化の証明である．定理3.2の一般の仮定の場合は，一般化クリスタライン流の近似により示す．まず S^1 を $\mathcal{N}$ の頂点を含む多角形で近似する．その辺の長さが近似パラメーター $\varepsilon \to 0$ のときゼロに収束するようにとる．その多角形の頂点全体の集合を $\mathcal{M}^{\varepsilon}$ とする．そして S^1 上の正値連続関数 M^{ε} をFrank図形が頂点 $(1/M(\vec{m}))\,\vec{m}$, $\vec{m} \in \mathcal{M}^{\varepsilon}$ を結んだ形となる,（必ずしも凸でない）多角形体となるようにとる．条件 (M_i) の α_i に対して，少なくとも α_i のかわりに $\alpha_i/2$ をとれば M^{ε} も $\varepsilon \in (0,1)$ によらない $\alpha_i' = \alpha_i/2$ に対して条件 (M_i) を満たすようにとれる．また，近似初期凸多角形体 K_0^{ε} を，各 ε に対してそのファセットの向き全体が $\mathcal{M}^{\varepsilon}$ に一致しかつハウスドルフの距離で $\partial K_0^{\varepsilon} \to \partial K_0$ $(\varepsilon \to 0)$ となるようにとる.（必然的に性質Gを満たす.）このとき

$$V = M^{\varepsilon}(\vec{n})(\kappa_{\gamma} + \sigma)$$

に対応する一般化されたクリスタライン流を考え，上の考察を行う．このとき M^{ε} が条件 (M_i) を ε によらない α_i' に対して満たすことにより，δ' は $\varepsilon \in (0,1)$ によらずにとれることに注意する．全ファセット化の時間の評価が ε によらないようにでき，少なくとも $t \in [t^{\delta}, T_1]$ で $\partial K_t^{\varepsilon}$ が許容凸多角形になることはわかる．近似定理[GG01]より，$\varepsilon \to 0$ とした解も，この時間区間で許容凸多角形であることがわかる．これが定理3.2の(i)の証明の概略である．(ii), (iii)は初期値問題の解の一意性から容易にわかる．次の節で十分時間がたった後の運動の単調性を示す．これにより定理3.2の証明が完成する.

5.5 許容ファセットの速度の正負

さて，初期値がCを含み，Cに一致しない場合は，ある時刻から定理3.2の解は外向き速度がどのファセットでも正になることは次のようにして示される．ここでも一般化されたクリスタライン流を考える．これは次の事実に基づく．

(1) 非許容ファセットの速度はいつも$M(\vec{n}_j)\sigma > 0$である．つまり外向きに正である．

(2) 許容ファセットの速度はいったん正になったら再びゼロになることはない．もし$t = t_0$でゼロとなり，その隣のファセットの速度がゼロでなく正であるとすると，ファセットの長さが$(t - t_0)$のオーダーで伸びることが幾何学的考察からわかる．これより$\kappa_\gamma + \sigma$が$\alpha(t - t_0)$で近似できることがわかる．ただし$\alpha > 0$である．しかし，これでは$t < t_0$で既に速度は負になり，t_0のとり方に矛盾している．周辺の速度もゼロに$t = t_0$でなったとしても，隣に1つでも速度正のファセットがあったら，同様な議論ができる．

(3) どんな初期凸多角形であっても，どの辺もある時刻から先，速度は正になる．まず初期値Γ_0はCを含み，Cから離れているとしてよい．これはクリスタラインの比較定理[GGu]よりいえる．そこで，Γ_0が$(1+\delta)C$を含むようにδをとる．これを初期値としての解は$\mathbf{R}^2$全体に広がっていくことが$V = (\inf M)(\kappa_\gamma + \sigma)$の自己相似解の比較とでわかる．ずっと負または速度ゼロのファセットがあったとすると，この$(1+\delta)C$を初期値とした解とΓ_tがぶつかってしまうからである．(この正速度になる時間の評価は一般化されたクリスタライン流による近似パラメータのとり方によらない.)

注意 本節では必ずしも許容ファセット以外のファセットを持つ凸多角形に対して(1.2)の解の挙動を考察した．このような問題は$\sigma = 0$のとき既にクリスタライン流に対して[Ya]で考察されている．この場合凸多角形は有限時間で消えるが，その前にすべての非許容ファセットは消えてしまうことが証明されている[Ya].

参考文献

[AG] S. B. Angenent and M. E. Gurtin, Multiphase thermomechanics with interfacial structure. II. Evolution of an isothermal interface, *Arch. Rational Mech. Anal.* **108** (1989), 323–391.

[BGN1] J. W. Barrett, H. Garcke and R. Nürnberg, On stable parametric finite element methods for the Stefan problem and the Mullins-Sekerka problem with applications to dendritic growth, *J. Comput. Phys.* **229** (2010), 6270–6299.

[BGN2] J. W. Barrett, H. Garcke and R. Nürnberg, Finite element approximations of one-sided Stefan problems with anisotropic approximately crystalline, Gibbs-Thomson law, *Adv. Differential Equations* **18** (2013), 383–432.

[BGN3] J. W. Barrett, H. Garcke and R. Nürnberg, Numerical computations of facetted pattern formation in snow crystal growth, *Physical Review E* **86** (2012), 011604, arXiv:1202.1272v1.

[B] G. Bellettini, An introduction to anisotropic and crystalline mean curvature flow, Proceedings of minisemester on evolution of interfaces, Sapporo 2010, *Hokkaido University Technical Report Series in Math.* **#145** (2010), 102–159.

[DE] K. Deckelnick and C. M. Elliott, Local and global existence results for anisotropic Hele-Shaw flows, *Proc. Roy. Soc. Edinburgh Sect. A* **129** (1999), 265–294.

[ES] J. Escher and G. Simonett, Classical solutions for Hele-Shaw models with surface tension, *Adv. Differential Equations* **2** (1997), 619–642.

[GG98] M.-H. Giga and Y. Giga, Evolving graphs by singular weighted curvature, *Arch. Rational Mech. Anal.* **141** (1998), 117–198.

[GG98a] M.-H. Giga and Y. Giga, A subdifferential interpretation of crystalline motion under nonuniform driving force, Dynamical systems and differential equations, Vol. I (Springfield, MO, 1996), *Discrete Contin. Dynam. Systems 1998*, Added Volume I, 276–287.

[GG99] M.-H. Giga and Y. Giga, Stability for evolving graphs by nonlocal weighted curvature, *Comm. Partial Differential Equations* **24** (1999), 109–184.

[GG00] M.-H. Giga and Y. Giga, Crystalline and level set flow — convergence of a crystalline algorithm for a general anisotropic curvature flow in the plane, *GAKUTO Internat. Ser. Math. Sci. Appl.* **13** (2000), 64–79.

[GG01] M.-H. Giga and Y. Giga, Generalized motion by nonlocal curvature in the plane, *Arch. Ration. Mech. Anal.* **159** (2001), 295–333.

[GG10] M.-H. Giga and Y. Giga, Very singular diffusion equations – second and fourth order problems, *Japanese J. Ind. Appl. Math.* **27** (2010), 323–345.

[GG12] M.-H. Giga and Y. Giga, On the role of kinetic and interfacial anisotropy in the crystal growth theory, *Hokkaido University Preprint Series in Math.* **#1019** (2012).

[GGH] M.-H. Giga, Y. Giga and H. Hontani, Self-similar expanding solutions in a sector for a crystalline flow, *SIAM J. Math. Anal.* **37** (2005), 1207–1226.

[GGP] 儀我 美保, 儀我 美一, ポジャール ノルベルト, 粘性解理論による強特異拡散方程式の数学解析, 京都大学数理解析研究所講究録, 本号.

[GGR] M.-H. Giga, Y. Giga and P. Rybka, A comparison principle for singular diffusion equations with spatially inhomogeneous driving force for graphs, *Hokkaido University Preprint Series in Math.* **#981** (2011).

[G00] Y. Giga, Anisotropic curvature effects in interface dynamics, *Sūgaku* **52** (2000), 113–117; English translation, *Sūgaku Expositions* **16** (2003), 135–152.

[G04] Y. Giga, Singular diffusivity — facets, shocks and more, In: *Applied math. entering the 21st century (eds. J. M. Hill and R. Moore), ICIAM* (Sydney, 2003), *SIAM* (Philadelphia, 2004), 121–138.

[G06] Y. Giga, *Surface evolution equations: A level set approach*, Birkhäuser Verlag, Basel (2006).

[GGu] Y. Giga and M. E. Gurtin, A comparison theorem for crystalline evolution in the plane, *Quart. Appl. Math.* **54** (1996), 727–737.

[GK] Y. Giga and R. V. Kohn, Scale-invariant extinction time estimates for some singular diffusion equations, *Discrete Contin. Dynam. Systems* **30** (2011), 509–535.

[GR02] Y. Giga and P. Rybka, Quasi-static evolution of 3-D crystals grown from supersaturated vapor, *Differential Integral Equations* **15** (2002), 1–15.

[GR05] Y. Giga and P. Rybka, Stability of facets of self-similar motion of a crystal, *Adv. Differential Equations* **10** (2005), 601–634.

[Gir] P. M. Girão, Convergence of a crystalline algorithm for the motion of a simple closed convex curve by weighted curvature, *SIAM J. Numer. Anal.* **32** (1995), 886–899.

[GirK] P. M. Girão and R. V. Kohn, Convergence of a crystalline algorithm for the heat equation in one dimension and for the motion of a graph by weighted curvature, *Numer. Math.* **67** (1994), 41–70.

[GrGr] J. Gravner and D. Griffeath, Modeling snow crystal growth: A three-dimensional mesoscopic approach, *Phys. Rev. E* **79** (2009), 011601-1-18.

[IPS] H. Ishii, G. E. Pires and P. E. Souganidis, Threshold dynamics type approximation schemes for propagating fronts, *J. Math. Soc. Japan* **51** (1999), 267–308.

[I] T. Ishiwata, Motion of non-convex polygons by crystalline curvature and almost convexity phenomena, *Japan J. Indust. Appl. Math.* **25** (2008), 233–253.

[Kn] C. Kneisel, Über das Stefan-Problem mit Oberflächspannung und thermischer Unterkühlung, *Ph.D. thesis, Leibniz Universität Hannover*, Germany (2007).

[KG] R. Kobayashi and Y. Giga, On anisotropy and curvature effects for growing crystals. Recent topics in mathematics moving toward science and engineering, *Japan J. Indust. Appl. Math.* **18** (2001), 207–230.

[L] K. G. Leibbrecht, The physics of snow crystals, *Rep. Prog. Phys.* **68** (2005), 855–895.

[M06] P. B. Mucha, Stefan problem in a 2D case, *Colloq. Math.* **105** (2006), 149–165.

[M12] P. B. Mucha, Regular solutions to a monodimensional model with discontinuous elliptic operator, *Interfaces Free Bound.* **14** (2012), 145–152.

[MP12] P. B. Mucha and P. Rybka, A note on a model system with sudden directional diffusion, *J. Stat. Phys.* **146** (2012), 975–988.

[MP12a] P. B. Mucha and P. Rybka, Well-posedness of sudden directional diffusion equations, http://arxiv.org/abs/1207.4929

[Oc] Y. Ochiai, Facet-creation between two facets moved by crystalline curvature, *Master's thesis, University of Tokyo* (2009).

[PS] J. Prüss and G. Simonett, Stability of equilibria for the Stefan problem with surface tension, *SIAM J. Math. Anal.* **40** (2008) 675–698.

[S] H. Spohn, Surface dynamics below the roughening temperature, *J. Phys. I. France* **3** (1993) 61–81.

[T] J. E. Taylor, Constructions and conjectures in crystalline nondifferential geometry, In: *Differential Geometry (eds. B. Lawson and K. Tanenblat), Proceedings of the Conference on Differential Geometry* (Rio de Janeiro, 1991), Pitman Monographs Surveys Pure Appl. Math. **52** Pitman London (1991), 321–336.

[Ya] S. Yazaki, Motion of nonadmissible convex polygons by crystalline curvature, *Publ. Res. Inst. Math. Sci., Kyoto Univ.* **43** (2007), 155–170.

[Y] E. Yokoyama, Formation of patterns during growth of snow crystals, *J. Crystal Growth* **128** (1993), 251–257.

[YK] E. Yokoyama and T. Kuroda, Pattern formation in growth of snow crystals occurring in the surface kinetic process and the diffusion process, *Physical Review A* **41** (1990), 2038–2049.